## 4.4 변환 생성원으로서 연산자들 - 운동량과 하밀토니안 연산자 (Operators as Generators of Transformations - Momentum and Hamiltonian Operators)

양자역학에서 연산자들은 통상 상태(함수)에 작용하여 그 상태에 변화를 준다. 이러한 변환 중에서 중요하면서도 대표적인 것으로 위치에 변화를 주는 평행이동(translation) 현상과 주어진 상태의 시간에 따른 변화를 주는 시간변화(time evolution) 현상을 생각할 수 있다. 한편 유한변환(finite transformation)은 극미변환(infinitesimal transformation)들의 거듭되는 곱으로 생각할 수 있는데 이처럼 임의의 유한변환을 이끌어 내는 극미변환 연산자를 우리는 생성원(generator)이라고 부른다. 위에서 예로 든 평행이동과 시간변화에 해당하는 각각의 생성원으로서 운동량과 하밀토니안 연산자가 있다. 이제부터 운동량 및 하밀토니안 연산자가 각각 어떻게 평행이동과 상태의 시간변화를 주는 생성원이 되는지 알아보기로 하겠다.

### • 평행이동의 생성원으로서 운동량 연산자

그림[4.2]에서와 같이 $x_0$ 에 그 중심이 위치한 파동묶음(wave packet)으로 주어지는 1차원 파동함수 $\psi(x)$를 생각하자. 이제 이 파동묶음을 $\Delta x$ 만큼 평행이동한 파동묶음으로 주어지는 파동함수를 $\tilde{\psi}(x)$ 라고 하자. 그러면, 두 파동함수는 다음과 같은 관계로 주어짐을 알 수 있다.

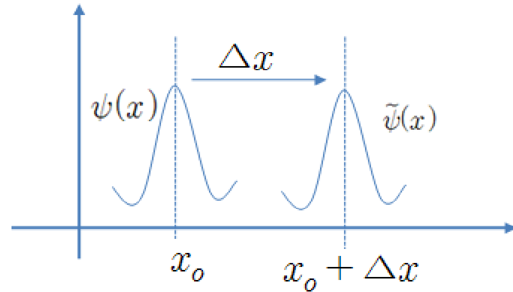
$$\tilde{\psi}(x) = \psi(x - \Delta x)$$

여기서 $\psi(x - \Delta x)$를 테일러 전개하면 $\tilde{\psi}(x)$ 는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\tilde{\psi}(x) = \psi(x) - \Delta x \frac{d\psi}{dx} + O((\Delta x)^2)$$

한편, 운동량 $p_x$ 는 위치 $x$ 에 대한 미분연산자로 다음과 같이 표현되므로,

$$p_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} ,$$




[그림4.2] 파동함수의 평행이동

우리는 평행이동된 파동함수 $\tilde{\psi}(x)$ 를 운동량 연산자로 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\tilde{\psi}(x) = \psi(x) - \frac{i}{\hbar}\Delta x \; p_x \, \psi(x) + O((\Delta x)^2)$$

여기서 평행이동($\Delta x$ )이 아주 작을(infinitesimal) 경우에 우리는 위 표현을 다시 지수함수로 표현할 수 있으며, 우리는 이러한 변환과정을 원래의 파동함수 $\psi(x)$에 평행이동 연산자 $\mathfrak{T}(\Delta x)$ 가 작용한 결과로 생각할 수 있다.

$$\tilde{\psi}(x) \simeq e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x \, p_x} \psi(x) := \mathfrak{T}(\Delta x)\psi(x)$$

위에서 평행이동 연산자는 $\mathfrak{T}(\Delta x) := e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x \, p_x}$ 으로 표현되는데 여기서 우리는 운동량 연산자 $p_x$ 를 평행이동 변환을 일으키는 생성원(translation generator)이라고 부른다.

• **시간변화의 생성원으로서 하밀토니안 연산자**

이제 시간변화(time evolution) 연산자 $T(t+\epsilon, t)$ 가 시간 $t$ 에서의 파동함수 $\psi(x,t)$ 를 시간 $t+\epsilon$ 에서의 파동함수 $\psi(x,t+\epsilon)$ 로 변환시킨다고 하자.

$$\psi(x,t+\epsilon) = T(t+\epsilon,t)\,\psi(x,t)$$

여기서, 테일러 전개를 하면 위 식은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi(x,t+\epsilon) = \psi(x,t) + \epsilon\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} + O(\epsilon^2)$$

한편 앞에서 우리는 하밀토니안 연산자가 시간에 대한 미분연산자로 다음과 같이 주어짐을 알고 있다.

$$H = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

즉, 위의 시간변화에 대한 표현은 다음과 같이 하밀토니안 연산자로 표현할 수 있다.

$$\psi(x,t+\epsilon) = \psi(x,t) - \frac{i}{\hbar}\epsilon H\psi(x,t) + O(\epsilon^2) := T(t+\epsilon,t)\,\psi(x,t)$$

그러므로 시간변화 연산자 $T(t+\epsilon, t)$ 는 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$T(t+\epsilon, t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon H + O(\epsilon^2)$$

이는 앞에서의 평행이동 연산자 $\mathfrak{J}(\triangle x)$ 표현에서 평행이동 $\triangle x$ 를 시간변화 $\epsilon$에 운동량 연산자 $p_x$ 를 하밀토니안 연산자 $H$ 로 바꾸어 표현하면 시간변화 연산자 $T(t+\epsilon, t)$ 가 얻어짐을 보여준다. 그리고 여기서 $T(t, t) = 1$ 을 만족함을 주목하도록 하자.

이제 $t_0$ 에서 $t$ ( $t_0 < t$ ) 로의 유한한 시간변화를 주는 연산자 $T(t, t_0)$ 를 생각해보자. 여기서 $t - t_0 = n\epsilon$ 이라고 하고, 통상 그렇듯이 하밀토니안 연산자 $H$ 가 시간에 의존하지 않는 경우를 가정하면, $T(t, t_0)$ 는 $T(t_i+\epsilon, t_i)$ 를 $n$ 번 반복하여 작용한 것과 같으므로, $n$ 을 무한대로 보내는 극한을 생각하면 우리는 다음의 결과를 얻는다.

$$T(t, t_0) = \lim_{\substack{n\to\infty \\ \epsilon\to 0}}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon H\right)^n$$

여기서 $\epsilon = \dfrac{t-t_0}{n}$ 이므로, 위식은 다시 다음과 같이 지수함수로 표현될 수 있다.

$$T(t, t_0) = \lim_{n\to\infty}\left[1 - \frac{i}{\hbar}\left(\frac{t-t_0}{n}\right)H\right]^n = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right]$$

그러므로 우리는 임의의 시간 $t$ 에서의 파동함수 $\psi(x,t)$ 를 처음 시간 $t_0$ 에서의 파동함수 $\psi(x,t_0)$ 로부터 시간변화 연산자 $T(t, t_0)$ 를 써서 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi(x,t) = T(t,t_0)\,\psi(x,t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H\right]\psi(x,t_0)$$

이 표현은 유한한 평행이동에서의 표현과 같은 방식임을 알 수 있다. 하밀토니안이 시간에 의존하는 경우라도, 시간변화가 아주 작을 경우는 우리는 위에서 시간변화 연산자 $T$ 가 하

밀토니안 $H$ 로 표현됨을 보았다. 이처럼 하밀토니안 연산자 $H$ 는 상태의 시간변화를 이끌어내므로 우리는 하밀토니안 연산자를 시간변화의 생성원(time evolution generator)이라고 부른다. 여기서 우리가 주목할 점은 하밀토니안은 에르미트 연산자이므로 시간변화 연산자 $T$ 는 평행이동 연산자의 경우와 마찬가지로 유니타리성(unitarity)를 만족한다는 것이다.